2º SEMESTRE: CÁLCULO NUMÉRICO CON FORTRAN.

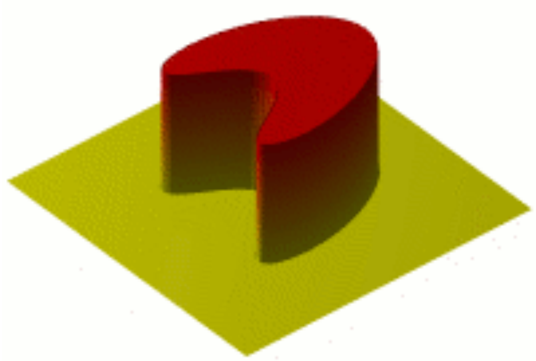
TEMARIO:

1. Sistemas lineales. Directos e iterativos.
2. Cálculo de autovalores.
3. Derivación e integración numérica.
4. Solución de ecuaciones y sistemas no lineales.
5. Solución numérica de ecuaciones diferenciales.

¿Qué es una ecuación diferencial?

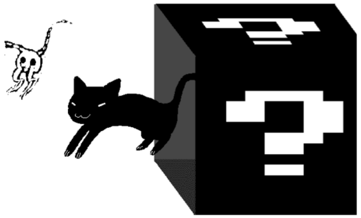
- Expresión matemática que relaciona una función con sus derivadas.
- Ejemplos:
  - Ecuación del calor

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = 0$$



  - Ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t)$$



  - Navier-Stokes (momento)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\, \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho\, \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla \cdot p\, \mathbf{I} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho\, \mathbf{g}$$

¿Qué es una ecuación diferencial?

- Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs):
  - Relacionan una función desconocida de una variable independiente con su derivada.

$$F = ma \longrightarrow \frac{dv(t)}{dt} = F/m$$

- Ecuaciones en derivadas parciales (EDPs):
  - Relacionan una función multivariable con sus derivadas parciales.

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right) = 0$$

Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs)

- Problema de valor inicial (problema de Cauchy)
  - Ecuación diferencial ordinaria + condición inicial.

$$F = ma \longrightarrow \frac{dv(t)}{dt} = F/m$$

$$v(0) = 0$$

- Problema de contorno
  - Ecuación diferencial ordinaria + condiciones de contorno

$$\frac{d^2T}{dx^2} = 0 \qquad T(0) = 283$$

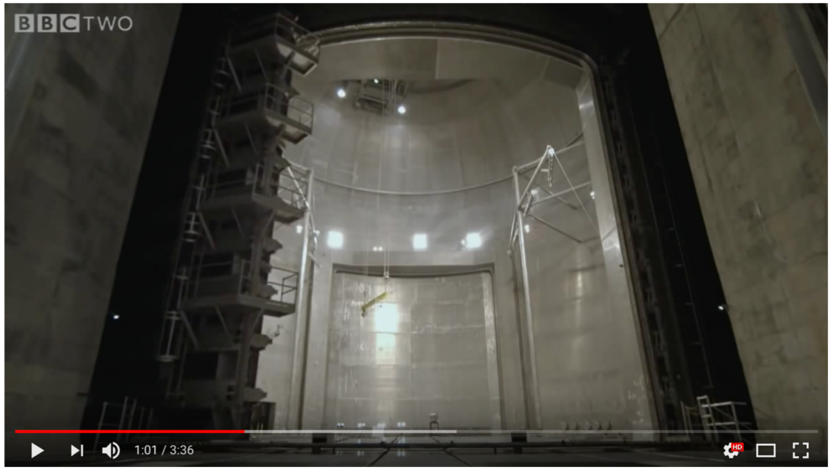
$$T(1) = 500$$

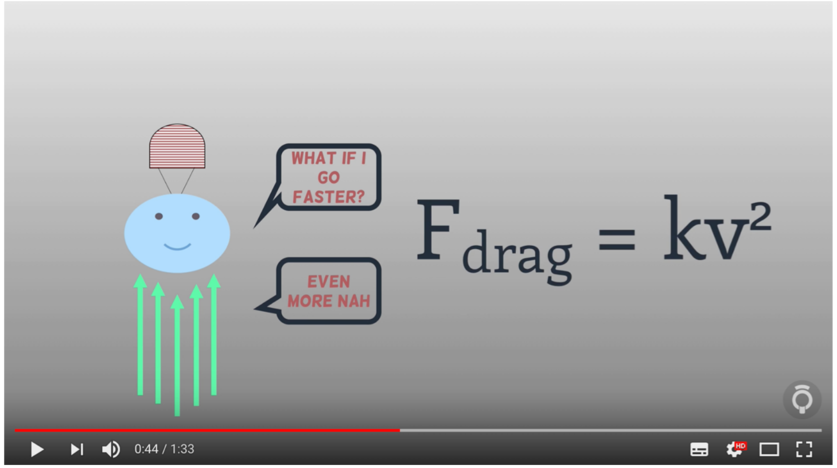
Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs)

- Problema paracaidista (valor inicial)

$$F = ma \longrightarrow \frac{dv(t)}{dt} = F/m$$

$$\frac{dv(t)}{dt} = \frac{mg - Cv(t)^2}{m}$$

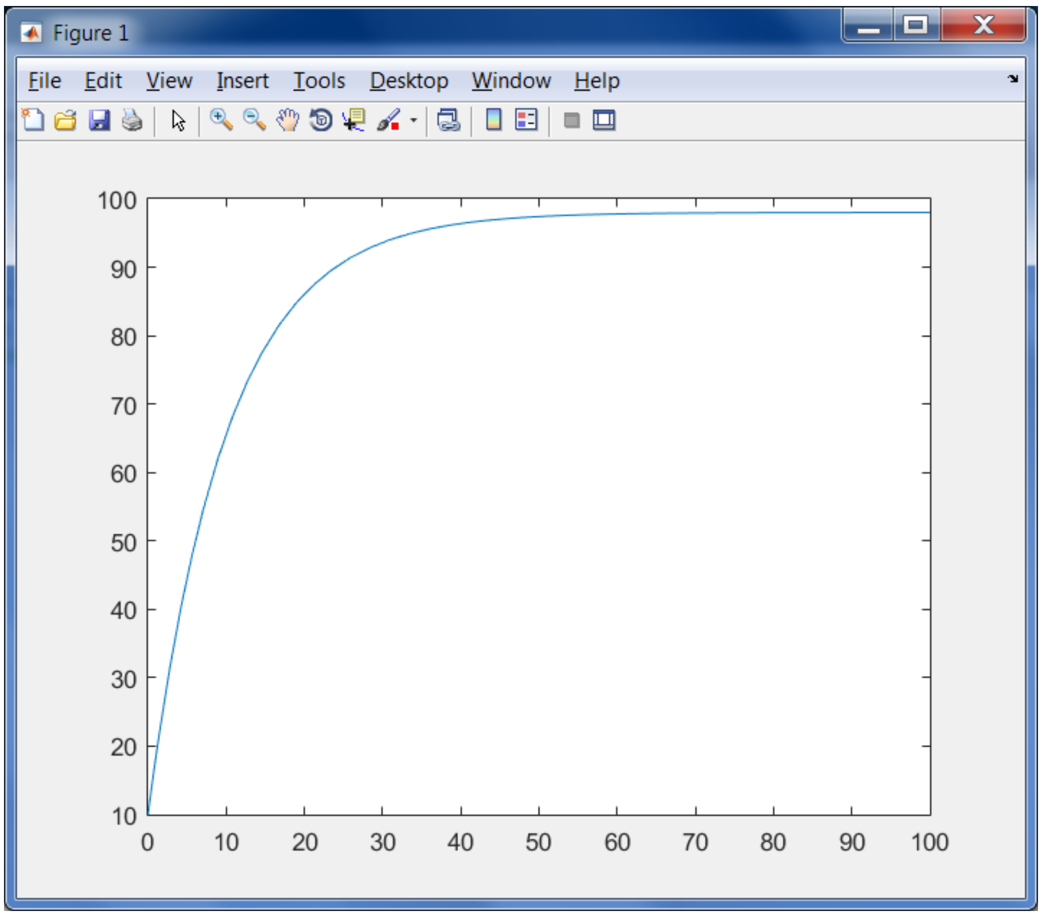


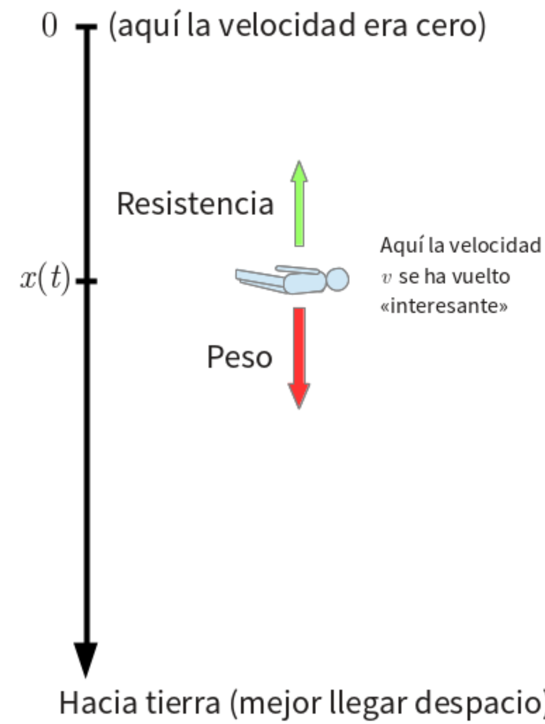


Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs)

- Problema paracaidista (VI)

$$\frac{dv(t)}{dt} = \frac{mg - Cv(t)^2}{m}$$





elpinguinotolkiano

Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs)

- Problema barra calor (problema de contorno)

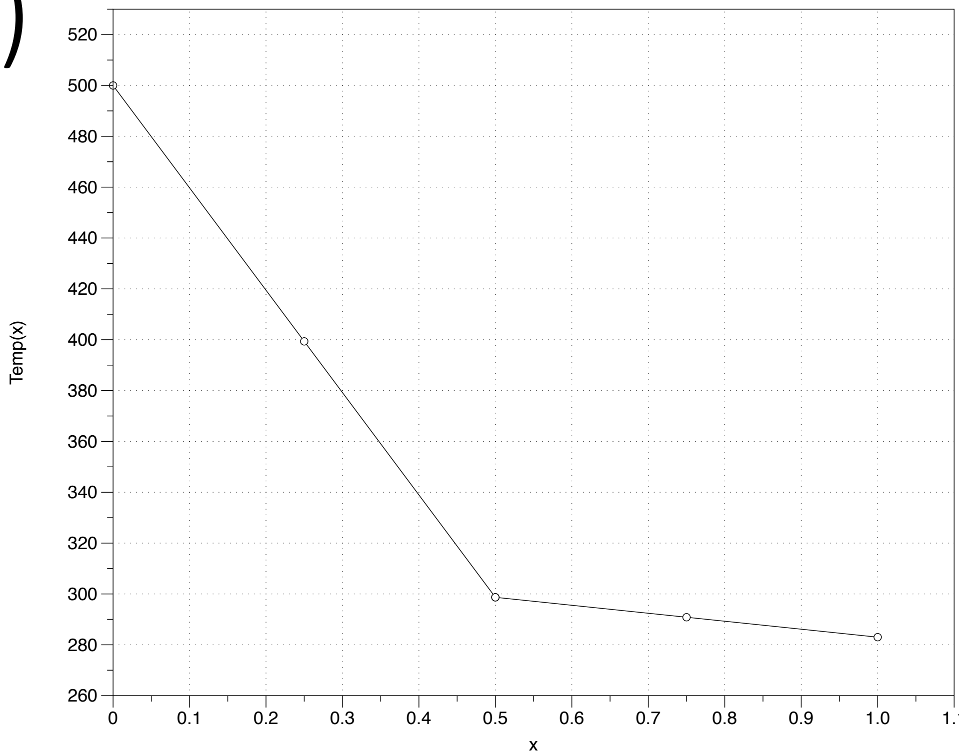
$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k(x)\frac{\partial T}{\partial x}\right)=0 \qquad x=[a,b]$$

$$T(a)=T_0 \quad T(b)=T_1$$

- k is thermal conductivity (W/(m·K))
- ρ is density (kg/m³)
- c_p is specific heat capacity (J/(kg·K))

Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs)

- Problema barra calor (problema de contorno)



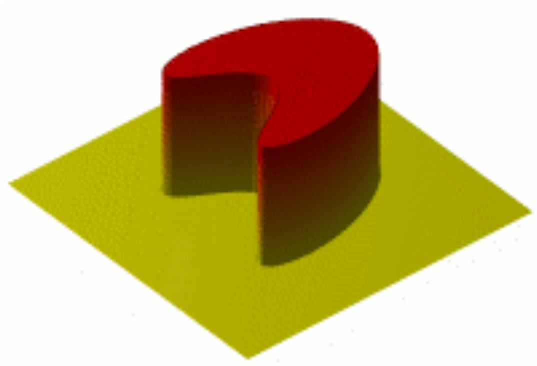
¿Qué es una ecuación diferencial?

- ~~Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs):~~
  - ~~Relacionan una función desconocida de una variable independiente con su derivada.~~

$$\cancel{F = ma} \longrightarrow \cancel{\frac{dv(t)}{dt} = F/m}$$

- Ecuaciones en derivadas parciales (EDPs):
  - Relacionan una función multivariable con sus derivadas parciales.

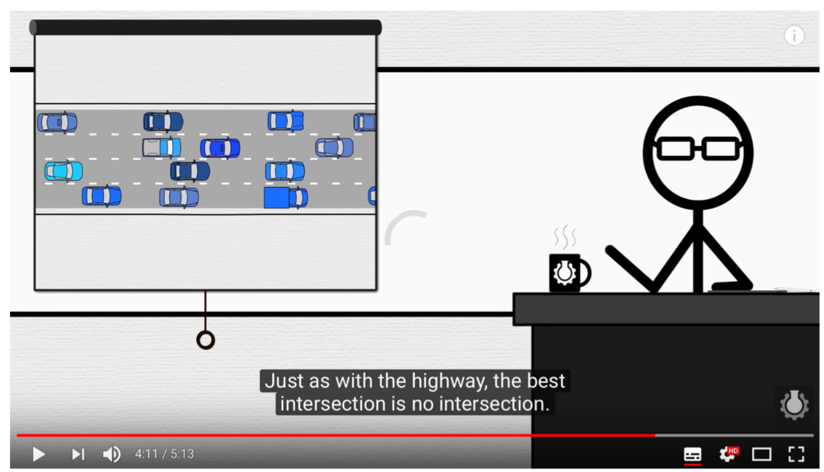
$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = 0$$



Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (EDPs)

- Ecuación de Burgers con viscosidad

$$\frac{\partial y}{\partial t} + y\frac{\partial y}{\partial x} = \nu\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}.$$



Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (EDPs)

- Ecuaciones de Navier Stokes

Ecuación de Navier-Stokes: (Aerodinámica-Mecánica de Fluidos)

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{U} + \nabla \cdot \vec{F} = 0$$

densidad

velocidad

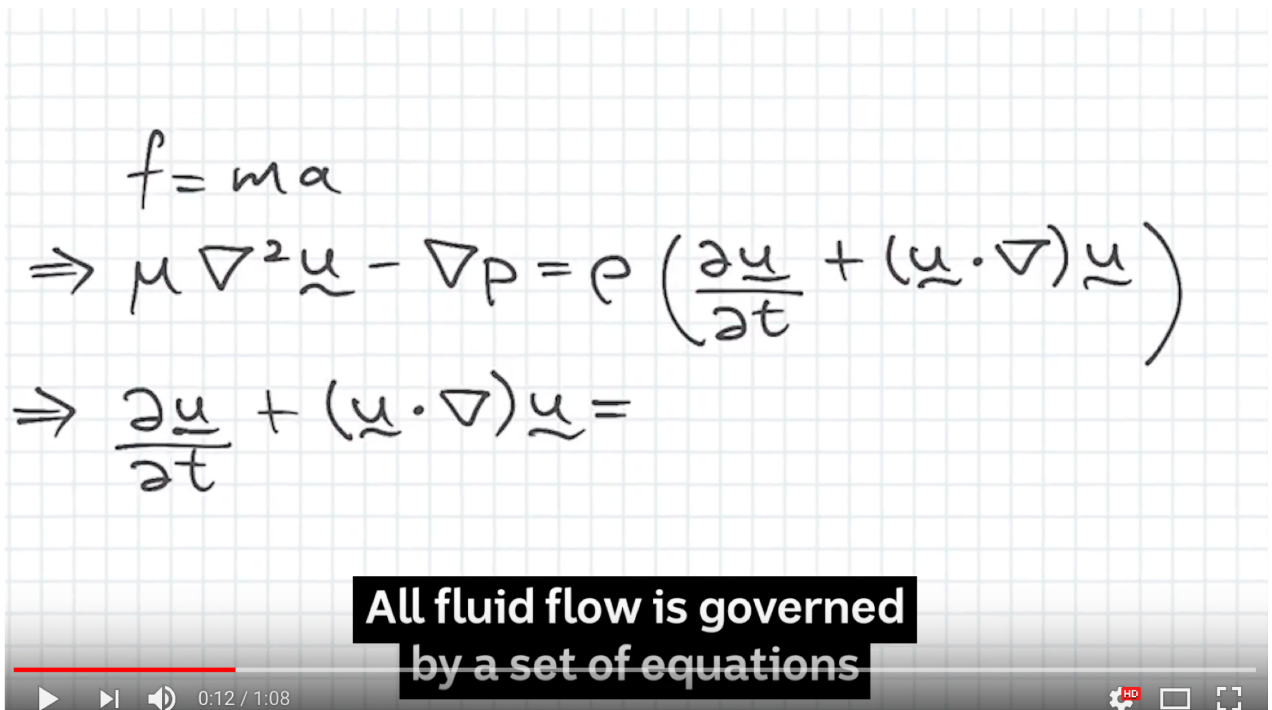
$$\vec{U} = \begin{vmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{vmatrix} \qquad \vec{F}(\vec{U}) = \begin{vmatrix} \rho u & \rho v & \rho w \\ \rho u^2 + P - \tau_{xx} & \rho u v - \tau_{xy} & \rho u w - \tau_{zx} \\ \rho u v - \tau_{xy} & \rho v^2 + P - \tau_{yy} & \rho w v - \tau_{zy} \\ \rho u w - \tau_{xz} & \rho v w - \tau_{yz} & \rho w^2 + P - \tau_{zz} \\ u(\rho E + P) - (\tau U)_x - q_x & v(\rho E + P) - (\tau U)_y - q_y & w(\rho E + P) - (\tau U)_z - q_z \end{vmatrix}$$

energía

Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (EDPs)

- Ecuaciones de Navier Stokes

Ecuación de Navier-Stokes: (Aerodinámica-Mecánica de Fluidos)



Métodos numéricos para ED ordinarias: unipaso/multipaso

¿Cómo, a partir de una EDO, nos montamos un algoritmo cuya solución sea un conjunto de puntos que aproxima a la solución de la EDO?

Pasamos de una EDO (continua) a una ecuación en diferencias (discreta)

Bibliografía complementaria:

Cálculo Numérico en Ecuaciones Diferenciales Ordinarias, Juan A. Hernández, Aula Documental de Investigación

Problema de Valor inicial

Método de Euler

- ✓ Se basa en reescribir el problema de Cauchy usando como aproximación a la derivada una de las fórmulas de derivación numérica.

Problema de Valor inicial

Método de Euler

- ✓ Se basa en reescribir el problema de Cauchy usando como aproximación a la derivada una de las fórmulas de derivación numérica.

Problema de Cauchy

$$\frac{dy}{dt} = f(y); \;\; y(0) = y_0$$

Problema de Valor inicial

Método de Euler

- ✓ Se basa en reescribir el problema de Cauchy usando como aproximación a la derivada una de las fórmulas de derivación numérica.

Problema de Cauchy

$$\frac{dy}{dt} = f(y); \;\; y(0) = y_0$$

Diferencias atrasadas

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y(t)-y(t-h)}{h}$$

METODO DE EULER

- ✓ Se basa en reescribir el problema de Cauchy usando como aproximación a la derivada una de las fórmulas de derivación numérica.

Problema de Cauchy

$$\frac{dy}{dt} = f(y); \quad y(0) = y_0$$

Derivada numérica atrasada

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y(t)-y(t-h)}{h}$$

Esquema numérico (Euler)

$$\frac{y(t)-y(t-h)}{h} = f(y(t-h))$$

$$y(t) = y(t-h) + hf(y(t-h))$$

METODO DE EULER

✓ Se basa en reescribir el problema de Cauchy usando como aproximación a la derivada una de las fórmulas de derivación numérica.

Problema de Cauchy

$$\frac{dy}{dt} = f(y); \quad y(0) = y_0$$

Derivada numérica 'retrasada'

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y(t)-y(t-h)}{h}$$

Esquema numérico (Euler)

$$\frac{y(t)-y(t-h)}{h} = f(y(t-h))$$

$$y(t) = y(t-h) + hf(y(t-h))$$

✓ Es necesario discretizar la variable independiente *t* en pasos de ancho *h:*

(i) Si t no está acotado, simplemente definimos un valor de h.

(ii) Si t ϵ [a,b], entonces $y(a) = y_0$, y h se define a partir del número de subintervalos *n* en el que discretizamos [a,b] tal que $\mathrm{h} = \frac{b-a}{n}$

METODO DE EULER

EJEMPLO:

$$\frac{dU(t)}{dt} = -U(t)$$
$$U(0) = 1$$

Llamando:

$$t_n = t_0 + n \cdot dt; \quad U^n = U(t_n); \quad F(U^n) = -U^n;$$

y tomando:

$$\frac{dU}{dt} = \frac{U^{n+1} - U^n}{dt}$$

Resulta la expresión:

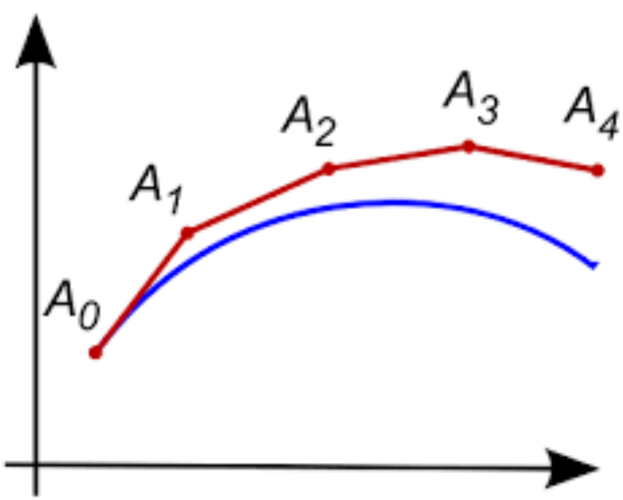
$$\frac{U^{n+1} - U^n}{dt} = -U^n \rightarrow \quad U^{n+1} = U^n - dt \cdot U^n$$

De modo iterativo desde $U(t_0) = U(0) = U^0 = 1$

$$U^1 = U^0 - dt \cdot U^0 = U^0(1 - dt)$$
$$U^2 = U^1 - dt \cdot U^1 = U^1(1 - dt) = U^0(1 - dt)^2$$
$$U^3 = U^2 - dt \cdot U^2 = U^2(1 - dt) = U^0(1 - dt)^3$$

...

$$U^{n+1} = U^n - dt \cdot U^n = U^n(1 - dt) = U^0(1 - dt)^{n+1}$$

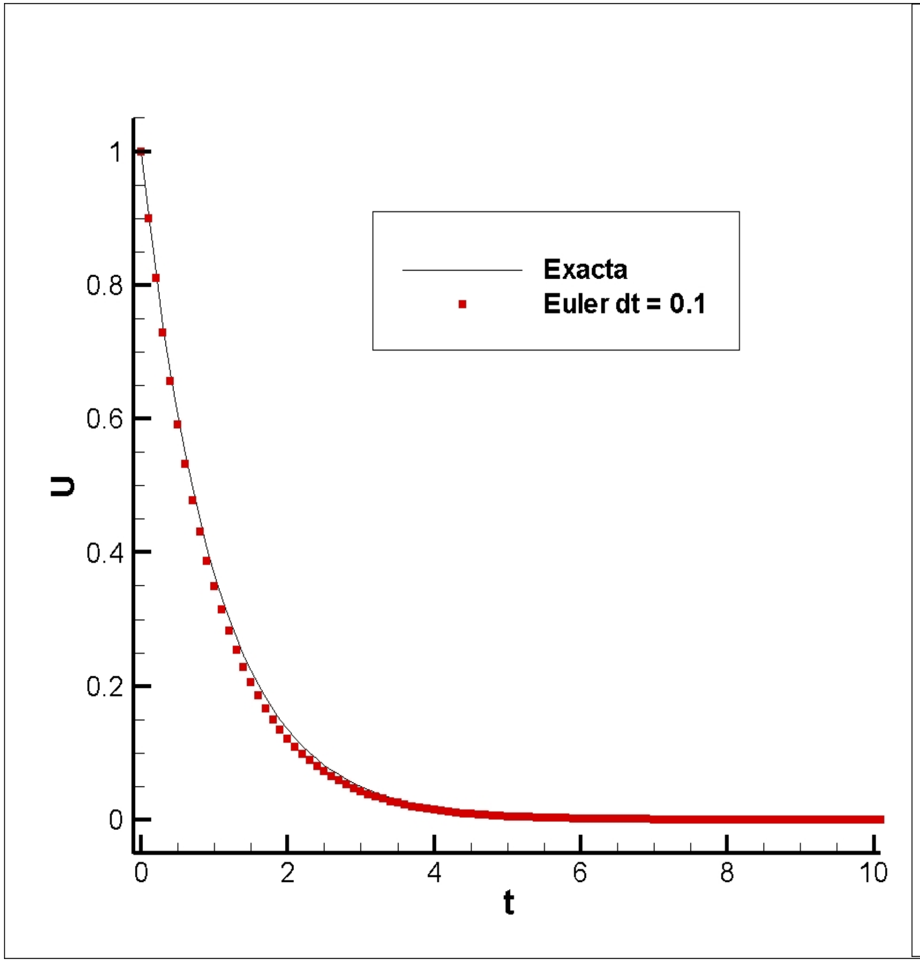


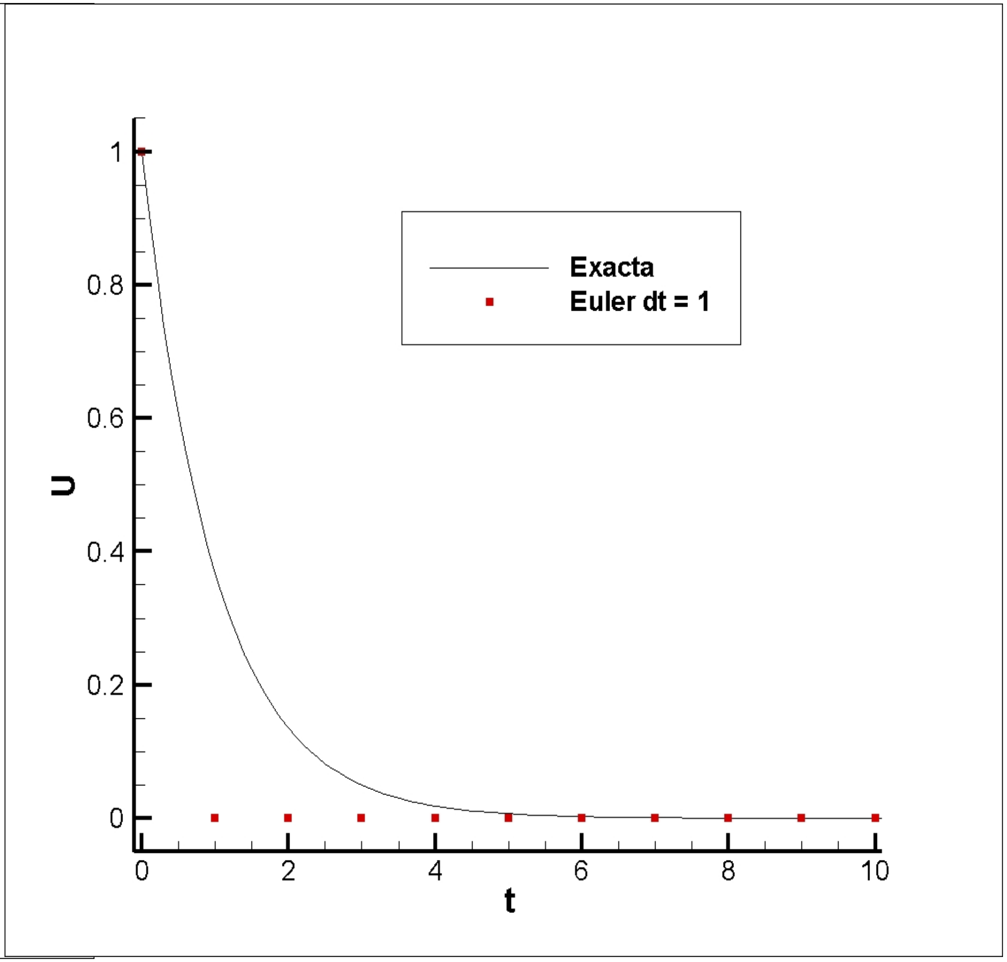
METODO DE EULER

EJEMPLO:

$$\frac{dU(t)}{dt} = -U(t)$$

IMPORTANTE SELEECIONAR UN VALOR DE PASO DE TIEMPO (dt) adecuado





CLASIFICACION DE LOS METODOS NUMERICOS

❖ Esquemas explícitos vs esquemas implícitos:

Si en el algoritmo que discretiza la EDO, el valor de la variable en el paso (k+1)-ésimo, $U^{(k+1)}$ puede expresarse únicamente en función de la información en pasos anteriores, se dice que el esquema es ***explícito:***

$$U^{(k+1)} = \boldsymbol{f}\left(U^{(k)}, U^{(k-1)}, \dots\right)$$

Si $U^{(k+1)}$ no se puede despejar explícitamente en función de los pasos anteriores, diremos que el esquema es *implícito.*

Ejemplos: en derivación numérica, el esquema de diferencias **retrasadas** siempre es explícito, mientras que el de diferencias **centradas** es implícito.

La implementación de un esquema explícito es, por tanto, mucho más sencilla que la de un esquema implícito en general.

CLASIFICACION DE LOS METODOS NUMERICOS

❖ Ejemplo de esquema implicito. Backward Euler.

Dado un problema de valor inicial,

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = f(t, y)$$

evaluamos la derivada usando diferencias finitas, como en un esquema explícito. Sin embargo, evaluamos la función en el instante siguiente:

$$y_{k+1} = y_k + hf(t_{k+1}, y_{k+1}).$$

El valor de la función en el instante siguiente, $f(t_{k+1},y_{k+1})$ no es conocido. Es necesario encontrar el valor y_{k+1} que anula la función:

$$G = y_{k+1} - y_k - hf(t_{k+1}, y_{k+1})$$

Este valor lo podemos encontrar utilizando el método de Newton en cada iteración sobre la función G:

$$y_{k+1}^{i+1} = y_{k+1}^{i} - \frac{G(y_{k+1}^{i})}{G'(y_{k+1}^{i})} \qquad G'\left(y_{k+1}^{i}\right) = 1 - h\frac{df}{dy}\Big]_{(t_{k+1}, y_{k+1}^{i})}$$

CLASIFICACION DE LOS METODOS NUMERICOS

❖ Esquemas unipaso vs esquemas multipaso:

Los esquemas **unipaso** son aquellos en donde para la determinación del valor de $U^{(k+1)}$ necesitamos conocer únicamente el valor de $U^{(k)}$ y de $F(U^{(k)})$. Por tanto el esquema numérico que describe la EDO consta de una ecuación y una única condición inicial.
Ejemplos: Euler, Runge Kutta...

Los esquemas **multipaso** son aquellos en donde para la determinación del valor de $U^{(k+1)}$ necesitamos conocer el valor de U ,y de $F(U)^{p}$ en p(p>1) pasos anteriores, y necesitamos ir almacenando esa información en diferentes pasos. Por tanto estos métodos requieren p condiciones iniciales.
Ejemplos: Adams-Bashforth, Adams-Moulton...

Por sencillez, en este curso nos centraremos en esquemas unipaso de tipo explícito.

METODO DE EULER

Implementación de la subrutina del método

```
!*****************************************************************
!*                                                               *
!*  Euler method for the Initial Value Problem :                 *
!*                  dU/dt = F(U,t),     U(t_0) = U^0             *
!*                                                               *
!*  Numerical scheme :                                           *
!*                  U^{n+1} = U^n  +  dt * F(U^n,t_n)            *
!*                                                               *
!*  (explicit and first order accurate)                          *
!*                                                               *
!*                                                               *
!*                                                               *
!*   Inputs :                                                    *
!*                                                               *
!*          m  : system of m equations                           *
!*          U  : m--dimensional vector U(t_n)                    *
!*          t  : time                                            *
!*          F  : m--dimensional vector valued function F(U(t_n), t_n)  *
!*          dt  : time step                                      *
!*                                                               *
!*                                                               *
!*                                                               *
!*  Outputs :                                                    *
!*                                                               *
!*          U  : m--dimensional vector U(t_{n+1})                *
!*                                                               *
!*                                                               *
!*                                                               *
!*                                                               *
!*****************************************************************
```

```
subroutine Euler  ( m, U, t, dt, F )


   !*** Interface for the m--dimensional vector valued function F
   interface

         function F ( m, U, t )
               integer, intent(in)   :: m
               real(8), intent(in)   :: t, U(1:m)

               real(8)   :: F (1:m)
         end function F

   end interface


   !*** Dummy arguments specification
   integer, intent(in)    :: m
   real(8), intent(in)    :: t, dt
   real(8), intent(inout) :: U(1:m)


   !***    U^{n+1} = U^n  +  dt * F ( U^n, t_n )
              U      = U    +  dt * F ( m, U, t )


end subroutine Euler
```

Problema (para casa)

Sea el siguiente problema de Cauchy

$$\begin{cases} y' = y - t^2 + 1 \\ y(0) = 1/2 \end{cases} ; \qquad t \in [0, 2]$$

cuya solución exacta es $y(t) = (t+1)^2 - e^t/2$.

Emplea el método de Euler con *n=10 y 100* para calcular *y(t).*

Comentarios

- ✓ El método de Euler se basa en la discretización de la derivada. Si usamos discretizaciones de orden superior (basadas en hacer el desarrollo de Taylor hasta orden mayor que uno), tendremos esquemas de Euler de orden 2, 3, etc, que serán más precisos.
- ✓ Mientras que al esquema de orden 1 se le denomina comúnmente método de Euler, a esquemas de orden superior se les llaman esquemas de Taylor de orden *n.*

Trabajo de grupo

Explicación de métodos Runge Kutta.

Problema (presentación)

Sea el siguiente problema de Cauchy

$$\begin{cases} y' = y - t^2 + 1 \\ y(0) = 1/2 \end{cases} \quad ; \qquad t \in [0, 2]$$

cuya solución exacta es $y(t) = (t+1)^2 - e^t/2$.

Emplea el método de Euler con *n=10 y 100* para calcular *y(t).*
Comparar resultados con esquemas RK2 y RK4.

Trabajo de grupo

Explicación de método de Adams-Bashforth

Problema (presentación)

Sea el siguiente problema de Cauchy

$$\begin{cases} y' = y - t^2 + 1 \\ y(0) = 1/2 \end{cases} \quad ; \qquad t \in [0, 2]$$

cuya solución exacta es $y(t) = (t+1)^2 - e^t/2$.

Emplea el método de Euler con *n=10 y 100* para calcular *y(t).*
Comparar resultados con esquema de Adams-Bashforth.